$S(k,\omega)$ の巾について

一柳　正　和（阪大工）

中性子の非弾性散乱の cross section に関係する液体Heの dynamical structure factor $S(k,\omega)$

$$S(k,\omega)=\frac{1}{n}<0|\rho_k^{+}\,\delta(H-\omega)\,\rho_k|0>$$

$$=\frac{1}{n}\Sigma_i\,\delta(\omega_i-\omega)\cdot|<i|\rho_k|0>|^2 \tag{1}$$

を考える。ρ_k は density fluctuation operator, ω_i は中間状態の energy．今 ρ_k が系の良い collective variable であれば、$S(k,\omega)$ の巾は zero である。しかし、良く知られているように、十分小さいkでも、ρ_k はあまりよい変数でない。すなわち state $\rho_k|0>$ は系の固有状態でない。

Huang-Klein〔Ann. Phys. 30 203 ('64)〕は

$$S(k,\omega)=S(k)\cdot\frac{\Gamma_k/2\pi}{(\omega-(k)^2+\Gamma_k^2/4} \tag{2}$$

であることを示した。このことは phonon は系の single state に対応せず状態密度が

$$\frac{\Gamma_k/2\pi}{(\omega-ck)^2+\Gamma_k^2/4} \tag{3}$$

と与えられる一群の states に対応することになる。

$S(k,\omega)$ のこのような巾の原因として、まず phonon-phonon相互作用が考えられる。phonon-phonon 相互作用は back-flowの効果であることは良く知られている。例えば ρ_k と正確に canonical conjugate である v_k を導入した Sunakawa らの Hamiltonian を使えば、phonon-phonon 相互作用まで考えると我々は

$$\dot{\rho}_k(t) \cong -i\omega_k \cdot \rho_k(t) - i\sum_q \omega_q \cdot \frac{k.q}{q^2} \rho_{k-q}\,\rho_q(+) \tag{4}$$

$$\omega^2(k) = \frac{k^2}{2m}\left(\frac{k^2}{2m} + 2nv(k)\right) \tag{5}$$

を得る。オ二項はFeynman 流の back-flow の効果が入つて来る。より正確には、二時間グリーン関数を用いることにより行える。結果だけ示すと、$S(k,\omega)$ 二種類の peak の重ね合せであることが分る。すなわち

(1) $\omega = \omega_k$ にある peak

(2) $\omega \doteqdot \sqrt{\omega_k^2 + \omega_p^2}$ にある peak.（pについては総和する）

このことは $S(k,\omega)$ の巾は、たしかに phonon-phonon相互作用によつて決まることを示している。

ところで sum rule であるが、$k \to 0$ ではオ1の peakでつくされることになり、ω_k は Feynman の spectrum となる。

$$\omega_k = \frac{k^2}{2m}\,\frac{1}{S(k)} \tag{6}$$

最後に、式(6)より potential $v(k)$ をもとめると

$$v(k) = \frac{k^2}{2m}\left[S^{-2}(k) - 1\right] \tag{7}$$

この式の巾に $S(k)$ の実験値を入れて、$v(r)$ を一次元でもとめると、Lennard-Jones potential に非常に近い形が得られることを記しておく。